Commentationes Mathematicae Universitatis Carolinae

Reinhard Steudel

Mathematische Behandlung eines Desorptionsmodells für biporöse Systeme

Commentationes Mathematicae Universitatis Carolinae, Vol. 21 (1980), No. 3, 605--618

Persistent URL: `http://dml.cz/dmlcz/106024`

COMMENTATIONES MATHEMATICAE UNIVERSITATIS CAROLINAE

21,3 (1980)

MATHEMATISCHE BEHANDLUNG EINES DESORPTIONSMODELLS FÜR BIPORÖSE SYSTEME

Reinhard STEUDEL

Zusammenfassung: Es wird gezeigt, dass bestimmte mathematische Modelle, die die Sorption in Festbetten mit biporöser Struktur beschreiben, auf ein nichtlineares Operatordifferentialgleichungssystem führen. Aufgrund bekannter Sätze ist gesichert, dass das System eine eindeutige Lösung besitzt. Es wird ein Iterationsverfahren angegeben, wo in jedem Schritt nur noch ein lineares Anfangswertproblem zu lösen ist.

Schlagworte: Nichtlineare Modelle biporöser Systeme, Operatordifferentialgleichungssystem, Iterationsverfahren.

Klassifikation: 47H15

Die funktionsgerechte Auslegung von Adsorptionskolonnen verlangt u.a. eine gute Kenntnis der bei der Sorption ablaufenden inneren Transportvorgänge. Es hat sich gezeigt, dass in Abhängigkeit von der Struktur des Systems, vom Adsorptiv, u.a., Mikro- und Makroporensystem Einfluss auf die Sorptionsvorgänge haben können (siehe etwa [5] und die dort zitierte Literatur).

Von K. Gröger wurden in [2,3] gewisse lineare und nichtlineare Modelle monoporöser Systeme mathematisch untersucht. Nichtlineare Adsorptionsmodelle für biporöse Systeme mit nichtlinearen Diffusionskoeffizienten oder nichtlinearer Isotherme wurden in [6] untersucht. In der vorliegenden Arbeit werden die Ergebnisse von Steudel ([7]) auf ein Desorptionsmodell für biporöse Systeme angewendet. Es wird gezeigt, dass das Rand-Anfangswertproblem, das den zur Diskussion stehenden Prozess beschreibt, als Operatordifferentialgleichungssystem in einem geeigneten Hilbert-Raum aufgefasst werden kann. Zudem wird ein Iterationsverfahren angegeben, wo in jedem Schritt nur noch ein lineares Anfangswertproblem zu lösen ist. Durch Kombination des Galerkin-Verfahrens mit dem Iterationsverfahren entsteht das sogenannte Projektions-Iterationsverfahren, bei dessen numerischen Realisierung im Wesentlichen nur noch Integrale auszuwerten sind.

1. <u>Das Modell</u> (siehe z.B. [4,5] (lineare Modelle)).
Gesucht werden drei reelle Funktionen $C_a(\mathcal{T},R), q(\mathcal{T},R,\tilde{R})$, $C_g(\mathcal{T})$, die für $0 \leq \mathcal{T} \leq \mathcal{T}_o$, $0 \leq R \leq R_o$, $0 \leq \tilde{R} \leq \tilde{R}_o$ definiert sind und den folgenden Gleichungen genügen:

$$\beta_a \frac{\partial C_a}{\partial \mathcal{T}} = \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R}\left(R^2 D_a\left(\frac{C_a}{C_{go}}\right)\frac{\partial C_a}{\partial R}\right) - \frac{3}{\tilde{R}_o}(1-\beta_a-\beta_s) \left(D_i\left(\frac{q}{C_{go}}\right)\frac{\partial q}{\partial \tilde{R}}\right)\Big|_{\tilde{R}=\tilde{R}_o} \quad \mathcal{T} \in\,]0,\mathcal{T}_o[\,,\ R \in\,]0,R_o[\,, \tag{1}$$

$$\frac{\partial q}{\partial \mathcal{T}} = \frac{1}{\tilde{R}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{R}}\left(\tilde{R}^2 D_i\left(\frac{q}{C_{go}}\right)\frac{\partial q}{\partial \tilde{R}}\right), \quad \mathcal{T} \in\,]0,\mathcal{T}_o[\,,\ R \in\,]0,R_o[\,,\ \tilde{R} \in\,]0,\tilde{R}_o[\,, \tag{2}$$

$$\frac{3E}{R_o}\left(D_a(C_a/C_{go})\frac{\partial C_a}{\partial R}\right)\Big|_{R=R_o} + T_v \frac{dC_g}{d\mathcal{T}} = -\dot{V}(C_g - C_{go}),\ \mathcal{T} \in\,]0,\mathcal{T}_o[\,, \tag{3}$$

$$\begin{cases} \dfrac{q}{C_{go}}\Big|_{\tilde{R}=\tilde{R}_o} = h\left(\dfrac{C_a}{C_{go}}\right), & \dfrac{C_a}{C_{go}}\Big|_{R=R_o} = a\left(\dfrac{C_g}{C_{go}}\right) \\ \dfrac{\partial q}{\partial \tilde{R}}\Big|_{\tilde{R}=o} = 0, & \dfrac{\partial C_a}{\partial R}\Big|_{R=o} = 0\,, \end{cases} \tag{4}$$

(5) $q|_{\tau=o} = q_o$, $C_a|_{\tau=o} = C_{ao}$, $C_g|_{\tau=o} = C_{go}$.

Dabei bedeuten:

q Beladung in einer Mikrokugel

q_o Anfangsbeladung in einer Mikrokugel

C_a Sorbatkonzentration in einer Makropore

C_{ao} Anfangskonzentration in einer Makropore

C_g Sorbatkonzentration im Gasraum

C_{go} Anfangskonzentration im Gasraum

R radiale Koordinate der Makrokugel

R_o Radius der Makrokugel

$\tilde{R}$ radiale Koordinate einer Mikrokugel

$\tilde{R}_o$ Radius einer Mikrokugel

τ Zeit

$D_a = D_o f(C_a/C_{go})$ Makroporendiffusionskoeffizient

$D_i = D_1 g(q/C_{go})$ Mikroporendiffusionskoeffizient

β_a Makroporenanteil

β_s Feststoffanteil

E Einwaage

$\dot{V}$ Volumenstrom

Bzgl. f, g, h und a setzen wir voraus:

$$(6) \begin{cases} 0 < f_1 \leq f(s) \leq f_2 < \infty, & f \text{ messbar}, \ s \in \mathbb{R} \\ 0 < g_1 \leq g(s) \leq g_2 < \infty, & g \text{ messbar}, \ s \in \mathbb{R}, \end{cases}$$

$$(7) \begin{cases} |h(s)-h(t)| \leq h_1 |s-t|, \ \forall s,t \in \mathbb{R} \\ |a(s)-a(t)| \leq a_1 |s-t|, \ \forall s,t \in \mathbb{R}. \end{cases}$$

Gleichung (1) beschreibt die Stoffbilanz im Adsorbenskorn, (Makrokugel).(2) beschreibt die Stoffbilanz in einem Zeolithteilchen (Mikrokugel).(3) stellt die Adsorberbilanzgleichung dar und beschreibt die Stoffbilanz in der Gasphase.

(2) enthält R als Parameter.

Mit Hilfe der dimesionslosen Koordinaten

$$r = \frac{R}{R_o}, \ \rho = \frac{\tilde{R}}{\tilde{R}_o}, \ t = \frac{D_o \tau}{R_o^2 \beta_a} \ ,$$

der Parameter

$$\alpha = \frac{D_1 R_o^2}{R_o^2 D_o}, \ \beta = \frac{3 D_1 R_o^2 (1 - \beta_a - \beta_s)}{D_o \tilde{R}_o^2}, \ \alpha_1 = \frac{3 E D_o}{R_o^2 \dot{V}}, \ \alpha_2 = \frac{T_v D_o}{R_o^2 \dot{V}},$$

sowie $\tilde{u} = \dfrac{q}{C_{go}}$, $u = \dfrac{C_a}{C_{go}}$, $c = \dfrac{C_g}{C_{go}}$, $S = [0,T]$, $T = \dfrac{D_o \tau_o}{R_o^2 \beta_a}$,

$I =]0,1[$ ergibt sich aus (1)-(5) die klassische mathematische Aufgabenstellung: Gesucht werden Funktionen $u \in C(S \times \bar{I})$, $\tilde{u} \in C(S \times \bar{I} \times \bar{I})$, $c \in C(S)$, so dass

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 f(u) \frac{\partial u}{\partial r}\right) + \beta \left(g(\tilde{u}) \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \rho}\right)\Big|_{\rho=1} = 0, \ (t,r) \in S \times I \tag{8}$$

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} - \frac{\alpha}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho^2 g(\tilde{u}) \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \rho}\right) = 0, \ (t,r,\rho) \in S \times \bar{I} \times I \tag{9}$$

$$\alpha_1 \left(f(u) \frac{\partial u}{\partial r}\right)\Big|_{r=1} + \alpha_2 \frac{dc}{dt} + c - 1 = 0, \ t \in S \tag{10}$$

$$u|_{r=1} = a(c), \ \tilde{u}|_{\rho=1} = h(u), \ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \rho}\Big|_{\rho=o} = 0, \ \frac{\partial u}{\partial r}\Big|_{r=o} = 0 \tag{11}$$

$$u|_{t=o} = uo, \ \tilde{u}|_{t=o} = \tilde{u}_o, \ c|_{t=o} = 1 \tag{12}$$

mit $\tilde{u}_o = \dfrac{q_o}{C_{go}}$, $u_o = \dfrac{C_{ao}}{C_{go}}$.

2. Begriffe und Bezeichnungen. Wir führen zunächst die zur funktionalanalytischen Formulierung der Aufgabe (8)-(10) notwendigen, dem Problem angepassten Räume ein:

Wir definieren:

$V^*:=\{u \mid ru \in L^2(I)\}$, $\|u\|_{V^*}:=\|ru\|_{L^2(I)}$,

$H^1:=\{u\in V^* \mid \frac{du}{dr}\in V^*\}$, $H:=\{u\in H^1 \mid u(1)=0\}$, $\|u\|_H:=\left\|\frac{du}{dr}\right\|_{V^*}$

$H^{-1}:=H^*$; H^* bezeichne den zu H dualen Raum.

V^* wird als Teilmenge von H^{-1} aufgefasst, so dass die stetige und dichte Einbettung $H\subset V^*\subset H^{-1}$ gilt.

$K\in(H^1\longrightarrow H^{-1})$ wird als linearer und stetiger Operator durch

$$(Ku,v):=\int_0^1 r^2\,\frac{du}{dr}\,\frac{dv}{dr}\,dr,\ u\in H^1,\ v\in H$$

definiert. Die Einschränkung von K auf H ist die Dualitätsabbildung von H.

Ist $\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{du}{dr})\in C(I)$ und $\left.\frac{du}{dr}\right|_{r=o}=0$, so kann man leicht zeigen, dass $Ku=-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\,\frac{du}{dr})$ gilt. Wir setzen weiter

$V:=\{u\in H \mid Ku\in V^*\}$, V ist mit dem Skalarprodukt $(u,v)_V:=$ $:=(Ku,Kv)_{V^*}$ $\forall\, u,v\in V$ ein Hilbert-Raum. Aus der Definition von V folgt $V\subset H\subset V^*$. K ist die Dualitätsabbildung von V auf V^*.

Wir führen weiter folgende Räume ein:

$\tilde V^*:=\{\tilde u \mid r\varphi\,\tilde u\in L^2(I\times I)\}$, $\|\tilde u\|_{\tilde V^*}:=\|r\varphi\,\tilde u\|_{L^2(I\times I)}$

$\tilde H^1:=\{\tilde u\in\tilde V^* \mid \frac{\partial\tilde u}{\partial\varphi}\in\tilde V^*\}$, $\tilde H:=\{\tilde u\in\tilde H^1 \mid \tilde u(\cdot,1)=0\}$, $\|\tilde u\|_{\tilde H}:=$

$:=\left\|r\varphi\,\frac{\partial\tilde u}{\partial\varphi}\right\|_{L^2(I\times I)}$

$\tilde H^{-1}:=\tilde H^*$. Der lineare und stetige Operator $\tilde K\in(\tilde H^1\longrightarrow\tilde H^{-1})$ sei definiert durch

$$((\tilde K\tilde u,\tilde v)):=\int_{I\times I} r^2\varphi^2\,\frac{\partial\tilde u}{\partial\varphi}\,\frac{\partial\tilde v}{\partial\varphi}\,d\varphi\,dr,\ \tilde u\in\tilde H^1,\ \tilde v\in\tilde H.$$

Die Einschränkung von $\tilde{K}$ auf $\tilde{H}$ ist die Dualitätsabbildung von $\tilde{H}$ auf $\tilde{H}^{-1}$. Es sei weiter $\tilde{V} := \{\tilde{u} \in \tilde{H} \mid \tilde{K}\tilde{u} \in \tilde{V}\}$. $\tilde{V}$ ist mit dem Skalarprodukt $(\tilde{u},\tilde{v})_{\tilde{V}} := (\tilde{K}\tilde{u},\tilde{K}\tilde{v})_{\tilde{V}^*}$, $\forall \tilde{u},\tilde{v} \in \tilde{V}$ ein Hilbert-Raum.

Aus der Definition von $\tilde{V}$ folgt $\tilde{V} \subset \tilde{H} \subset \tilde{V}^*$. $\tilde{K}$ ist die Dualitätsabbildung von $\tilde{V}$ auf $\tilde{V}^*$.

Ist $\tilde{f} \in C(\bar{I} \times \bar{I})$, so wird durch $\tilde{u}(r,\varrho) = -\int_1^{\varrho} \frac{1}{\sigma^2} \int_0^{\sigma} \tau^2 \tilde{f}(r, \tau)\, d\tau\, d\sigma$ eine Funktion $\tilde{u} \in \tilde{V}$ mit $\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \varrho}\Big|_{\varrho=0} = 0$ und Ku=f definiert.
Da $C(\bar{I} \times \bar{I})$ in $\tilde{V}^*$ dicht liegt und $\tilde{K}$ einen Isomorphismus zwischen $\tilde{V}$ und $\tilde{V}^*$ vermittelt, ist die Menge $\tilde{D}$ der $\tilde{u}$ von der eben angegebenen Form dicht in $\tilde{V}$. Für $\tilde{u} \in \tilde{D}$ gilt

$$\int_I r^2 \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \varrho}(r,1)\right)^2 dr = 2 \int_I r^2 \int_I \varrho^2 \; \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \varrho}(r,\varrho) \; \frac{\partial}{\partial \varrho}\left(\varrho^2 \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \varrho}(r, \varrho)\right) d\varrho\, dr \leq 2 \, \|\tilde{u}\|_{\tilde{H}} \, \|\tilde{K}\tilde{u}\|_{\tilde{V}^*} \, .$$

Wegen der Dichtheit von $\tilde{D}$ in $\tilde{V}$ folgt daraus

$$(13) \qquad \left\| \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \varrho}(\cdot,1) \right\|^2_{V^*} \leq 2 \, \|\tilde{u}\|_{\tilde{H}} \, \|\tilde{u}\|_{\tilde{V}} \, , \quad \forall \tilde{u} \in \tilde{V}.$$

Wir definieren den linearen und stetigen Operator $R_1 \in (\tilde{V} \longrightarrow V^*)$ durch $R_1 \tilde{u} := \frac{\beta}{\alpha} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \varrho}(\cdot,1)$.
Für einen beliebigen Banach-Raum E bezeichne $L^2(S;E)$ den Raum der auf S definierten, zur zweiten Potenz integrablen Funktionen mit Werten in E.

Ist E ein Hilbert-Raum, so ist $L^2(S;E)$ ebenfalls ein Hilbert-Raum mit dem Skalarprodukt

$$(u,v)_{L^2(S;E)} = \int_S (u(t),v(t))_E \, dt.$$

Mit $L^2_\lambda(S;E)$ bezeichnen wir den Raum der auf S definierten Funktionen, für die

$$\|u\|^2_{L^2_\lambda(S;E)} := \int_S e^{-2\lambda t} \, \|u(t)\|_E \, dt$$

gilt. Dabei bezeichne λ einen positiven Parameter. Diese Norm ist offensichtlich zur ursprünglichen Norm in $L^2(S;E)$ äquivalent. $C(S;E)$ bezeichne den Raum der auf S definierten und stetigen Funktionen mit Werten in E.

Wir setzen $\mathcal{V}:=L^2_\lambda(S;V)$, $\mathcal{H}:=L^2_\lambda(S;H)$, $\mathcal{V}^*:=L^2_\lambda(S,V^*)$, $\tilde{\mathcal{V}}:=L^2_\lambda(S;\tilde{V})$, usw., sowie $\mathcal{W}:=\{u\in\mathcal{V}\,|\,u'\in\mathcal{V}^*\}$, $\tilde{\mathcal{W}}:=\{\tilde{u}\in\tilde{\mathcal{V}}\,|\,\tilde{u}'\in\tilde{\mathcal{V}}^*\}$. Dabei bezeichne u' ($\tilde{u}'$) die Ableitung von u ($\tilde{u}$) im Sinne der Distributionen über $]0,T[$ mit Werten in V^* ($\tilde{V}^*$). $\mathcal{W}$ ($\tilde{\mathcal{W}}$) ist stetig in $C(S;H)$ ($C(S;\tilde{H})$) eingebettet (siehe z.B. [1], Satz 1.17, Kap. IV).

Mit $\mathcal{L}$ bezeichnen wir den Raum der auf S definierten Funktionen mit Werten in R, für die gilt

$$\int_S e^{-2\lambda t}(u(t))^2 dt < \infty \ , \quad \lambda > 0.$$

Durch $Zu:=\left.\dfrac{\partial u}{\partial r}\right|_{r=1}$, $\forall u\in\mathcal{V}$

definieren wir einen linearen und stetigen Operator $Z\in(\mathcal{V}\longrightarrow\mathcal{L})$. Man rechnet leicht nach, dass

$$(14)\quad \|Zu\|^2_{\mathcal{L}} \leq 2\,\|u\|_{\mathcal{H}}\,\|u\|_{\mathcal{V}}, \quad \forall u\in\mathcal{V}$$

gilt. Wir definieren weiter die Funktionen $F_1(s)=\int_0^s f(p)dp$, $G_1(s)=\alpha\int_0^s g(p)dp$, $s\in\mathbb{R}$ und bezeichnen die durch F_1 bzw. G_1 erzeugten Nemyzki-Operatoren ebenfalls mit F_1 bzw. G_1. Die Operatoren $K\in(V\longrightarrow V^*)$, $\tilde{K}\in(\tilde{V}\longrightarrow\tilde{V}^*)$, $R_1\in(\tilde{V}\longrightarrow V^*)$, $F_1\in(V^*\longrightarrow V^*)$ bzw. $G_1\in(\tilde{V}^*\longrightarrow\tilde{V}^*)$ fassen wir als Abbildungen zwischen den entsprechenden zeitabhängigen Funktionenräumen auf und bezeichnen die entsprechenden Operatoren mit L, $\tilde{L}$, R, F bzw. G.

3. Funktionalanalytische Formulierung des Problems.

Wir setzen voraus, dass $u_0\in\mathcal{V}^*$, $\tilde{u}_0\in\tilde{\mathcal{V}}^*$ und suchen

Funktionen $u \in \mathcal{H}^1$, $\tilde{u} \in \tilde{\mathcal{H}}^1$, $c \in \mathcal{L}$ derart, dass $u-a(c) \in \mathcal{H}$, $\tilde{u}-h(u) \in \tilde{\mathcal{H}}$, $ZF(u) \in \mathcal{L}$, $u' \in \mathcal{V}^*$, $\tilde{u}' \in \tilde{\mathcal{V}}^*$ und $[u,\tilde{u},c]$ genügt dem System

(15) $u' + LF(u)+R(G(\tilde{u})-G(h(u)))=0$

(16) $\tilde{u}' + \tilde{L}G(\tilde{u})=0$

(17) $\alpha_1 \int_0^t Z(F(u(s))-F(a(c(s))))ds+ \int_0^t (c(s)-1)ds+ \alpha_2 c(t)=0$

(18) $u(0)=u_0$, $\tilde{u}(0)=\tilde{u}_0$.

Die Gleichungen (15),(16) bzw. (17) sind in den Räumen $\mathcal{H}^{-1}$, $\tilde{\mathcal{H}}^{-1}$ bzw. $\mathcal{L}$ sinnvoll definiert.

Für $u \in \mathcal{V}^*$, $\tilde{u} \in \tilde{\mathcal{V}}^*$ definieren wir neue Funktionen v, $\tilde{v}$ durch

(19) $v(t):= \int_0^t (F(u(s))-F(a(c(s))))ds$, $\tilde{v}(t):= \int_0^t (G(\tilde{u}(s))-$
$-G(h(u(s))))ds$.

Offensichtlich gilt $v(0)=0$, $\tilde{v}(0)=0$, $v' \in \mathcal{V}^*$ und $\tilde{v}' \in \tilde{\mathcal{V}}^*$.
Umgekehrt kann man zu Funktionen v, $\tilde{v}$ mit den eben genannten Eigenschaften Funktionen $u \in \mathcal{V}^*$, $\tilde{u} \in \tilde{\mathcal{V}}^*$ definieren, indem man setzt

$$(20) \begin{cases} u(t):=F^{-1}(v'(t)+F(a(c(t)))),\ \tilde{u}(t):=G^{-1}(\tilde{v}'(t)+ \\ +G(h(F^{-1}(v'(t)+F(a(c(t))))))) \text{ für fast alle } t \in S. \end{cases}$$

Wir definieren Operatoren $A \in (\mathcal{V}^* \times \mathcal{L} \longrightarrow \mathcal{V}^*)$ und $B \in (\mathcal{V}^* \times \tilde{\mathcal{V}}^* \times \mathcal{L} \longrightarrow \tilde{\mathcal{V}}^*)$ durch

$$(21) \begin{cases} A(v,z):=F^{-1}(v+F(a(z)))-u_0 \\ B(v,\tilde{v},z):=G^{-1}(\tilde{v}+G(h(F^{-1}(v+F(a(z))))))-\tilde{u}_0 \end{cases}$$

Die Transformationsformeln (19),(20) und die Definition (21) legen es nahe, für $[v,\tilde{v},c]$ folgende Aufgabe zu betrachten:

(22) $A(v',c)+Lv+R\tilde{v}=0$

(23) $B(v',\tilde{v}',c)+\tilde{L}\tilde{v}=0$

(24) $\alpha_1(Zv)(t)+c_2c(t)+\int_0^t(c(s)-1)ds=0$

(25) $[v,\tilde{v},c]\in \mathcal{W}\times\tilde{\mathcal{W}}\times\mathcal{L}$, $v(0)=0$, $\tilde{v}(0)=0$.

Wir betrachten (22)-(25) als funktionalanalytische Formulierung der Aufgabe (8)-(12).

Den Zusammenhang zwischen den Aufgaben (15)-(18) und (22)-(25) erläutert der folgende

Satz 1. ([6], Lemma 3.1) Ist $[u,\tilde{u},c]$ Lösung der Aufgabe (15)-(18), so wird durch (19) ein Paar $[v,\tilde{v}]$ definiert, so dass $[v,\tilde{v},c]$ Lösung der Aufgabe (22)-(25) ist.

Sei umgekehrt $[v,\tilde{v},c]$ Lösung von (22)-(25) und $[u,\tilde{u}]$ durch (20) definiert. Dann ist $[u,\tilde{u},c]$ Lösung von (15)-(18), wenn $[u,\tilde{u}]\in\mathcal{H}^1\times\tilde{\mathcal{H}}^1$, $[u',\tilde{u}']\in\mathcal{V}^*\times\tilde{\mathcal{V}}^*$.

Bemerkung 1. Die Aufgaben (15)-(18) und (22)-(25) sind äquivalent, falls $[u_0,\tilde{u}_0]\in H^1\times\tilde{H}^1$, $u_0|_{r=1}=a(1)$, $\tilde{u}_0|_{\rho=1}=h(u_0)$. (Siehe [6], Satz 2.6.)

Im folgenden befassen wir uns nur noch mit der Aufgabe (22)-(25).

4. Existenz und Einzigkeit

Satz 2. Die Aufgabe (22)-(25) besitzt eine eindeutig bestimmte Lösung.

Beweis: Der Operator $A(\cdot,z)$ ist stark monoton und Lipschitz-stetig, $A(x,\cdot)$ ist Lipschitz-stetig, d.h. es gilt

$$
(26)\begin{cases}
(A(x_1,z)-A(x_2,z),x_1-x_2)_{\mathcal{V}^*} \geq \dfrac{1}{f_2}\,\| x_1-x_2\|^2_{\mathcal{V}^*} \\
\| A(x_1,z)-A(x_2.z)\|_{\mathcal{V}^*} \leq \dfrac{1}{f_1}\,\| x_1-x_2\|_{\mathcal{V}^*} \\
\| A(x,z_1)-A(x,z_2)\|_{\mathcal{V}^*} \leq \dfrac{f_2a_1}{f_1}\,\| z_1-z_2\|_{\mathcal{L}} \quad \forall [x_i,z_i] \in \\
\qquad \in \mathcal{V}^* \times \mathcal{L}\,, \quad i=1,2, \\
[x,z] \in \mathcal{V}^* \times \mathcal{L}\,.
\end{cases}
$$

Der Operator $B(x,\cdot,z)$ ist stark monoton und Lipschitz-stetig, die Operatoren $B(\cdot,y,z)$ und $B(x,y,\cdot)$ sind Lipschitz-stetig, d.h. es gilt

$$
(27)\begin{cases}
(B(x,y_1,z)-B(x,y_2,z),y_1-y_2)_{\mathcal{V}^*} \geq \dfrac{1}{\alpha g_2}\,\| y_1-y_2\|^2_{\tilde{\mathcal{V}}^*} \\
\| B(x,y_1,z)-B(x,y_2,z)\|_{\tilde{\mathcal{V}}^*} \leq \dfrac{1}{\alpha g_1}\,\| y_1-y_2\|_{\tilde{\mathcal{V}}^*} \\
\| B(x_1,y,z)-B(x_2,y,z)\|_{\tilde{\mathcal{V}}^*} \leq \dfrac{g_2h_1}{g_1f_1\sqrt{3}}\,\| x_1-x_2\|_{\mathcal{V}^*} \\
\| B(x,y,z_1)-B(x,y,z_2)\|_{\tilde{\mathcal{V}}^*} \leq \dfrac{g_2f_2h_1a_1}{3g_1f_1}\,\| z_1-z_2\|_{\mathcal{L}}\,, \\
\forall [x_i,y_i,z_i] \in \mathcal{V}^* \times \tilde{\mathcal{V}}^* \times \mathcal{L}\,,\ i=1,2,\ [x,y,z] \in \mathcal{V}^* \times \tilde{\mathcal{V}}^* \times \mathcal{L}.
\end{cases}
$$

(26) und (27) folgen unmittelbar aus der Definition (21) der Operatoren A, B und den Voraussetzungen (6),(7). Wegen der Eigenschaften (13) bzw. (14) der Operatoren R bzw. Z folgt die obige Behauptung aus einem bekannten Resultat über die eindeutige Lösbarkeit nichtlinearer Operatordifferentialgleichungssysteme ([7], Satz 1).

<u>Bemerkung 2</u>. In [7] wurden Systeme der Form (22)-(25) auf eine Fixpunktgleichung reduziert.
Durch hinreichend grosse Wahl von λ (siehe 3.) gelingt mit Hilfe des Fixpunktsatzes von Banach der Nachweis der eindeu-

tigen Lösbarkeit des Systems.

5. Ein Iterationsverfahren

Satz 3. Für $0 < \varepsilon < \frac{f_1^2}{2f_2}$, $0 < \delta < \frac{\alpha g_1^2}{2g_2}$ konvergiert die durch die Vorschrift

$$(28)\begin{cases} \varepsilon(Lv_i+R\tilde{v}_i)+v_i'=v_{i-1}'-\varepsilon A(v_{i-1}',c_{i-1}) \\ \delta\tilde{L}\tilde{v}_i+\tilde{v}_i'=\tilde{v}_{i-1}'-\delta B(v_{i-1}',\tilde{v}_{i-1}',c_{i-1}) \\ \qquad c_i(t)=-\frac{\alpha_1}{\alpha_2}(Zv_{i-1})(t)-\frac{1}{\alpha_2}\int_0^t(c_{i-1}(s)-1)ds \\ v_i(0)=0,\ \tilde{v}_i(0)=0,\ [v_0,\tilde{v}_0,c_0]\in\mathcal{W}\times\tilde{\mathcal{W}}\times\mathcal{L} \quad \text{beliebig,}\end{cases}$$

bestimmte Folge $([v_i,\tilde{v}_i,c_i])_{i\geq 1}$ im Raum $\mathcal{W}\times\tilde{\mathcal{W}}\times\mathcal{L}$ gegen die Lösung $[v,\tilde{v},c]$ von (22)-(25).

Beweis. Für $0 < \varepsilon < \frac{f_1^2}{2f_2}$, $0 < \delta < \frac{\alpha g_1^2}{2g_2}$ ist die Abbildung $\mathcal{U}$, die jedem Tripel $[v,\tilde{v},c]\in\mathcal{W}\times\tilde{\mathcal{W}}\times\mathcal{L}$ die Lösung $[w,\tilde{w},d]$ des Systems

$$\begin{aligned} &\varepsilon(Lw+R\tilde{w})+w'=v'-\varepsilon A(v',c) \\ &\delta\tilde{L}\tilde{w}+\tilde{w}' \quad =\tilde{v}'-\delta B(v',\tilde{v}',c) \\ &\qquad d(t) \quad =-\frac{\alpha_1}{\alpha_2}(Zv)(t)\ -\frac{1}{\alpha_2}\int_0^t(c(s)-1)ds \\ &[w,w,d]\in\mathcal{W}\times\tilde{\mathcal{W}}\times\mathcal{L}\ ,\ w(0)=0,\ \tilde{w}(0)=0 \end{aligned}$$

zuordnet, eine strikt kontraktive Abbildung von $\mathcal{W}\times\tilde{\mathcal{W}}\times\mathcal{L}$ in sich, falls man auf $\mathcal{W}\times\tilde{\mathcal{W}}\times\mathcal{L}$ die folgende Norm einführt:

$$\|[x,y,z]\|^2_{\mathcal{W}\times\tilde{\mathcal{W}}\times\mathcal{L}} := \frac{p\varepsilon^2}{2}\|x\|^2_{\mathcal{V}}+2\varepsilon p\lambda\|x\|^2_{\mathcal{H}}+p(1-\frac{1}{6})\|x'\|^2_{\mathcal{V}*}+ \\ +\frac{k\delta^2}{2}\|y\|^2_{\tilde{\mathcal{V}}}+k\|y'\|^2_{\tilde{\mathcal{V}}*}+\|z\|^2_{\mathcal{L}}\ ,\ \text{mit}$$

$$p=\frac{4\alpha_1^2}{\sqrt{\lambda}\,\alpha_2^2\,\varepsilon^{3/2}},\quad \lambda \geq \frac{4(1+\sigma)\sqrt{\varepsilon}\,\beta^2\alpha_1^2}{k\,\alpha^2\alpha_2^2\delta^{3/2}},$$

wobei k so klein und σ so gross gewählt wird, dass

$$\frac{4\alpha_1^2}{\varepsilon^{3/2}\alpha_2^2\sqrt{\lambda}}\,L_1^2(2\varepsilon^2+\varepsilon f_2)+2kL_3^2(\delta\alpha\, g_2+2\delta^2)+\frac{T}{\alpha_2\lambda}<1$$

und

$$1-\frac{\varepsilon}{f_2}+\frac{2\varepsilon^2}{f_1^2}+\frac{\sqrt{\lambda}\;kL_2^2\alpha_2^2}{2\alpha_1^2}(2\delta^2+\delta g_2\alpha)\,\varepsilon^{3/2}+\frac{1}{\sigma}<1$$

mit $L_1=\frac{f_2}{f_1}a_1$, $L_2=\frac{g_2h_1}{g_1f_1\sqrt{3}}$, $L_3=\frac{g_2f_2h_1a_1}{3g_1f_1}$

gilt (siehe [5], Lemma 4).

Die Behauptung des Satzes folgt somit unmittelbar aus dem Fixpunktsatz von Banach.

Kombinieren wir das Iterationsverfahren (28) mit dem Galerkin-Verfahren für die Aufgabe (22)-(25), so entsteht das sogenannte Projektions-Iterationsverfahren. Dazu suchen wir Näherungslösungen $[z_n,\tilde{z}_n,e_n]$ der Aufgabe (22)-(25) in der Form

$$(29)\begin{cases} z_n(t)=\sum_{j=1}^{m} a_n^j(t)d_j,\quad \tilde{z}_n(t)=\sum_{j,k=1}^{m} c_n^{jk}(t)h_{jk}, \\ e_n(t)=-\frac{\alpha_1}{\alpha_2}(Zz_{n-1})(t)-\frac{1}{\alpha_2}\int_0^t(e_{n-1}(s)-1)ds, \text{ mit} \end{cases}$$

$$(30)\begin{cases} (z_n'(t)+\varepsilon(Kz_n(t)+R_1\tilde{z}_n(t)),d_j)_{V*}=(z_{n-1}'(t)-\varepsilon A(z_{n-1}', \\ c_{n-1})(t),d_j)_{V*} \\ (\tilde{z}_n'(t)+\delta\tilde{K}\tilde{z}_n(t),h_{jk})_{\tilde{V}*}=(\tilde{z}_{n-1}'(t)-\delta B(z_{n-1}',\tilde{z}_{n-1}',c_{n-1})(t), \\ h_{jk})_{\tilde{V}*} \\ z_0'=F(u^0)-F(a(c^0)),\tilde{z}_0'=G(\tilde{u}^0)-G(h(u^0)),[u^0,\tilde{u}^0,c^0]\in \mathcal{V}*\times\tilde{\mathcal{V}}*\times\mathcal{L} \\ \text{beliebig}, z_n(0)=0,\ \tilde{z}_n(0)=0;\ j,k=1,\dots,n,\ 0<\varepsilon<\frac{f_1^2}{2f_2}, \\ 0<\delta<\frac{g_1^2}{2g_2}. \end{cases}$$

Lösen wir das gewöhnliche Differentialgleichungssystem (30) (wir wählen $d_j = \frac{2}{r}\pi \sin j\pi r$, $h_{jk} = \frac{2}{r} \sin j\pi r \sin k\pi\varphi$), so ergeben sich folgende Rekursionsformeln zur Berechnung der Koeffizienten $a_n^j(t)$ und $c_n^{jk}(t)$:

$$a_n^j(t)=\exp(-\varepsilon j^2\pi^2 t)\int_0^t \exp(\varepsilon j^2\pi^2 s)\{(a_{n-1}^j)'(s)-\varepsilon R_1\tilde{z}_{n-1}(s)-$$

$$-\varepsilon A(z'_{n-1},c_{n-1})(s),d_j)_{V^*}\}\,ds,\quad a_{n-1}^n=0,\quad z'_0=F(u^0)-F(a(c^0)),$$

$j=1,\dots,n;$

$$c_n^{jk}(t)=\exp(-\sigma k^2\pi^2 t)\int_0^t \exp(\sigma k^2\pi^2 s)\{(c_{n-1}^{jk})'(s)-$$

$$-\sigma B(z'_{n-1},\tilde{z}'_{n-1},c_{n-1})(s),h_{jk})_{\tilde{V}^*}\}\,ds,\quad c_{n-1}^{nk}=0,\quad c_{n-1}^{jn}=0,$$

$j,k=1,\dots,n$, $\tilde{z}'_0=G(\tilde{u}^0)-G(h(u^0))$, $[u^0,\tilde{u}^0,c^0]\in\mathcal{V}^*\times\tilde{\mathcal{V}}^*\times\mathcal{L}$ beliebig.

Bei der numerischen Realisierung des Projektions-Iterationsverfahrens sind somit im Wesentlichen nur noch Integrale auszuwerten.

Es gilt folgender

Satz 4. ([6], Satz 2.13.) Für die durch (29),(30) definierte Folge gelten die folgenden Konvergenzaussagen:

$$[z'_n,\tilde{z}'_n]\longrightarrow[v',\tilde{v}']\text{ in }\mathcal{V}^*\times\tilde{\mathcal{V}}^*$$

$$[z_n,\tilde{z}_n]\longrightarrow[v,\tilde{v}]\text{ in }\mathcal{V}\times\tilde{\mathcal{V}}$$

$$[z_n,\tilde{z}_n]\longrightarrow[v,\tilde{v}]\text{ in }C(S;H)\times C(S;\tilde{H})$$

$$e_n\longrightarrow c\text{ in }\mathcal{L}.$$

L i t e r a t u r

[1] GAJEWSKI H., GRÖGER K., ZACHARIAS K.: Nichtlineare Operatorgleichungen und Operatordifferentialgleichungen, Akademie-Verlag Berlin 1974

[2] GRÖGER K.: Zum Rand-Anfangswertproblem der Adsorption und Diffusion bei Festbettprozessen, Math. Nachr. 49(1971), 251-259

[3] GRÖGER K.: Evolution equations modelling adsorption and diffusion in a fixed bed column (erscheint)

[4] MA Y.H., LEE T.Y.: Transient Diffusion in Solids with a Bipore Distribution, AIChE Journal, Vol. 22, No 1, 147-152(1976)

[5] ROETHE A., ROETHE K.-P., GELBIN D.: Beiträge zum Diffusionsverhalten in verformten Zeolithen, II, Chem. Technik, 29,1, 46-49(1977)

[6] STEUDEL R.: Iterative Lösung eines nichtlinearen Operatordifferentialgleichungssystems und ihre Anwendung auf Modelle biporöser Systeme, Dissertation, Magdeburg, 1979

[7] STEUDEL R.: Zur eindeutigen Lösbarkeit eines nichtlinearen Operatordifferentialgleichungssystems (erscheint in Comment. Math. Univ. Carolinae).

Technische Hochschule Otto von Guericke

Sektion Mathematik und Physik

Boleslaw-Bierut-Platz 5

301 Magdeburg

D D R

(Oblatum 29.10. 1979)